



TITLE:

# 遷移金属のバンド構造と磁性(第21回物性若手「夏の学校」開催後記)

AUTHOR(S):

浅野, 摂郎; 星, 淳一

---

CITATION:

浅野, 摂郎 ...[et al]. 遷移金属のバンド構造と磁性(第21回物性若手「夏の学校」開催後記). 物性研究 1976, 27(3): 94-96

ISSUE DATE:

1976-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89264>

RIGHT:

7月30日

◦極低温と伝導電子

— 電子相転移 —

東大物性研 田 沼 静 一

◦半導体の非線型伝導

中大理工 黒 沢 達 美

◦強誘電体の臨界現象(理論)

北大応電研 徳 永 正 晴

◦低次元超流体

東大物性研 中 嶋 貞 雄

◦臨界現象における展開理論(続)

東大教養 阿 部 龍 蔵

28日, 30日に予定されておりました次の講義は, 講師の御都合により中止になりました。また, 報告者は全て当支部員です。

◦液晶の構造と相転移

都立大理 小 林 謙 二

◦単結晶におけるX線回折現象とその応用

東大工 高 良 和 武

## 遷移金属のバンド構造と磁性

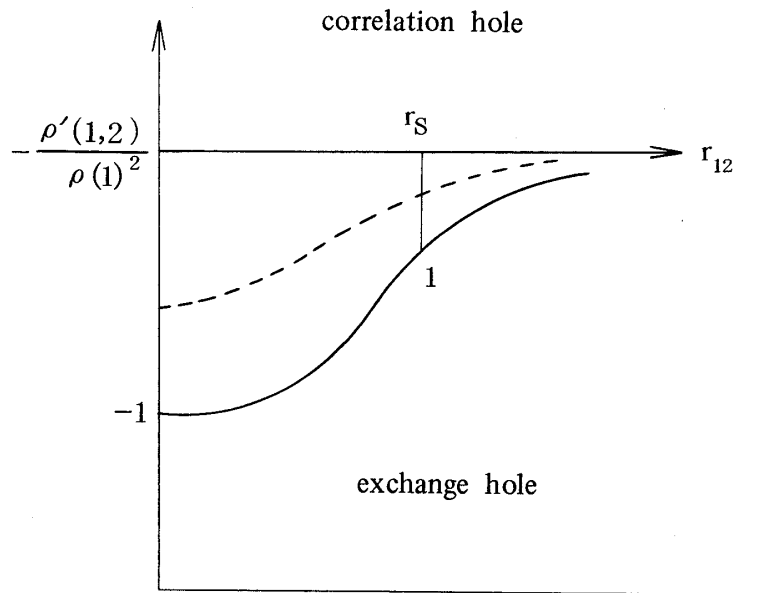
講師 東大教養 浅 野 摂 郎

講義の内容は次の通りである。

初めに有効ポテンシャルについて述べられた。Wigner-Seitz 近似では, 電子相関が強く取入れられている。HF 近似は, 同じ向きのスピンを持つ電子間の相関だけが取入れられている。Kohn-Sham の長所は, ビリアル定理を満足することである。多体効果の correlation hole を考慮する。

$X\alpha$  法は孤立原子で  $E_{X\alpha} = E_{HF}$  となるように  $\alpha$  を選ぶ方法で, Kohn-Sham は  $\alpha = \frac{2}{3}$  の場合に当たっている。

バンド計算の方法には, WS 法, OPW 法などがあるが, そのうちの偽ポテンシャル法は, 精度は 0.01 Ry であるが応用範囲が広い。APW 法は, 散乱理論から来た KKR 法とともに, 0.001 Ry と精度は一ケタよい。



遷移金属のバンド構造は fcc, bcc などの結晶系によって決まってしまう, 実験的なチェックは光吸収, 光電効果によって行なわれる。

ferro Ni と Fe について話された。Fe では, 強磁性または反強磁性が安定になり,  $J_{\text{eff}} \simeq 0.06 \text{ Ry}$  である。

最後に本論である「バンドモデルと局在スピンモデル」のノートを書いておく。

$$\Delta E_{\text{spin}} = \Delta E_{\text{el}} - J_{\text{eff}} \delta n^2 \quad \Delta E_{\text{el}} \gg \Delta E_{\text{spin}}$$

磁性を合金的に取扱う,

$$\chi_0(Q) = \sum_R \chi(R) e^{iQR} \quad \text{local な見方}$$

nearest まで取入れる。クラスターの coupling でモーメントを持つ,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_B + \frac{U}{2} \sum_i n_i^2 - J_{\text{eff}} \sum_i S_i^2$$

$$e^{-\beta F} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}$$

$$= \int e^{-\pi \sum_i x_i^2 - \pi \sum_i y_i^2} T_r \exp \{ -\beta [ \hat{\mathcal{H}}_B - \mu \hat{V} \\ + 2i \sqrt{\frac{\pi v}{2\beta}} \sum_i n_i x_i + 2i \sqrt{\frac{\pi J}{\beta}} \sum_i \hat{\xi}_i y_i - \sum_i 2\mu_B \hat{H} \hat{S}_i ] \} dx_i dy_i$$

汎関数積分と static 近似で

$$e^{-\beta F} = \int e^{-\pi \sum_i x_i^2 - \pi \sum_i y_i^2 - \beta f(\beta, \mu, H, x, y)} dy_i$$

$$h_i = \sqrt{\frac{\pi J}{\beta}} y_i - \mu_B H_i$$

$$F = -kT \ln \left( \frac{\beta}{\pi J} \right)$$

( 文責 星 淳一 )

## 原子レベルでの電子顕微鏡学

—— レンズ結像型電子顕微鏡コントラスト ——

講師 大阪大学工学部 橋 本 初 次 郎

最近の高性能の電子顕微鏡はその分解能が著しく向上し、点間隔で  $3\text{\AA}$ 、結晶の格子面間隔に対応する縞で  $0.72\text{\AA}$  の写真が写されるようになっている。しかし、このような電子顕微鏡を用いて結晶や分子内の一つ一つの原子を観察するには様々な困難な問題が存在する。以下、1) 空間に孤立した単原子と、2) 結晶内に配列した原子を可視化する場合の結像の原理についての概要を述べる。

### 1. 単原子の電子顕微鏡像

電子顕微鏡像の分解能  $d$  は、絞りによる回折収差とレンズの球面収差とを考慮して、optimum なレンズの開き角  $\alpha_{\text{opt}} (= 1.13 (\lambda/C_s)^{\frac{1}{4}})$  に対し